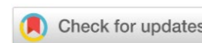
ИНФОРМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА И УПРАВЛЕНИЕ INFORMATION TECHNOLOGY, COMPUTER SCIENCE AND MANAGEMENT

УДК 538.915;538.958
https://doi.org/10.23947/2687-1653-2025-25-2-129-141

Оригинальное теоретическое исследование

Ab initio расчеты электронно-энергетической структуры и оптических свойств пироцирконатов лантана и неодима



А.А. Лаврентьев[1] ✉, Б.В. Габрельян[1], Ву Ван Туан[2], К.Ф. Калмыкова[1]
[1] Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация
[2] Институт вычислительной науки и искусственного интеллекта, Университет Ван Ланг, г. Хошимин, Вьетнам
✉ alavrentyev@donstu.ru

EDN: MJOLRM

Аннотация

Введение. Соединения с лантаном и неодимом ($La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$) обладают низкой теплопроводностью, высокой диэлектрической проницаемостью и температурой плавления, стабильностью и устойчивостью к дефектам. Их можно применять для теплоизоляции металлических компонентов в турбинах и воздушных двигателях. Кроме того, указанные соединения широко исследуются с точки зрения развития материаловедения, особенно при совершенствовании лазерной техники и оптики. Однако физические свойства $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ недостаточно экспериментально изучены. Этот пробел призвано восполнить представленное исследование. Цель работы — модельные расчеты электронной структуры и оптических свойств $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$.

Материалы и методы. На основе модельных расчетов в рамках теории функционала плотности исследована электронно-энергетическая структура пироцирконатов $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$, содержащих Zr и имеющих кристаллическую структуру пирохлора. В расчетах использовались взятые из литературы параметры кристаллической решетки $La_2Zr_2O_7$. Из-за отсутствия экспериментальных данных параметры для $Nd_2Zr_2O_7$ рассчитывались через минимизацию сил, действующих на атомы соединения. Применяется комбинированный обменно-корреляционный потенциал, учитывающий сильные взаимодействия *d*- и *f*-электронов атомов La и Nd с поправкой в форме модифицированного метапотенциала Беке-Джонсона. Для расчетов использовался пакет программ Wien2K.

Результаты исследования. Получены плотности электронных состояний всех атомов исследованных соединений. Сравниваются рассчитанные плотности валентных электронных состояний соединений с экспериментальными рентгеновскими фотоэлектронными спектрами. При нулевой энергии рассчитаны значения оптических характеристик $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$. Во-первых, это диэлектрическая проницаемость: для $La_2Zr_2O_7$ — 8,4334, для $Nd_2Zr_2O_7$ — 8,501. Во-вторых, преломление: для $La_2Zr_2O_7$ — 2,904, для $Nd_2Zr_2O_7$ — 2,916. В-третьих, отражение: для $La_2Zr_2O_7$ — 23,786 %, для $Nd_2Zr_2O_7$ — 23,935 %. Высокий оптический коэффициент поглощения ($>10^5$ см$^{-1}$) фиксируется в областях: от 5 до 14 эВ, от 14 до 28 эВ и от 28 до 40 эВ. Пиковые значения экстинкции приходятся на области от 5 до 13 эВ, от 14 до 28 эВ и от 28 до 40 эВ. Кристаллы $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ могут поглощать фотоны в широком диапазоне энергий (4–10 эВ).

Обсуждение и заключение. Исследование дополнило представления о свойствах $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ новыми экспериментальными данными. Рассчитаны плотности электронных состояний и оптические спектры соединений $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$. Это позволило объяснить особенности экспериментальных рентгеновских фотоэлектронных спектров соединений. В приближении модифицированного потенциала Беке-Джонсона получены значения ширин запрещенных полос соединений, соответствующие экспериментальным. Исследование относится к фундаментальным и может открыть перспективы создания более эффективных, надежных и функциональных материалов, лазерных и оптических устройств.

Ключевые слова: электронная энергетическая структура, свойства группы пирохлоров, модифицированный метапотенциал Беке-Джонсона, пироцирконаты лантана и неодима, оптические свойства $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$, рентгеновские фотоэлектронные спектры

Благодарности. Авторы выражают благодарность рецензентам, чья критическая оценка представленных материалов и высказанные предложения по их совершенствованию способствовали значительному повышению качества статьи.

Для цитирования. Лаврентьев А.А., Габрельян Б.В., Ву Ван Туан, Калмыкова К.Ф. *Ab initio* расчеты электронно-энергетической структуры и оптических свойств пироцирконатов лантана и неодима. *Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don).* 2025;25(2):129–141. https://doi.org/10.23947/2687-1653-2025-25-2-129-141

Original Theoretical Research

Ab initio Calculations of the Electronic-Energy Structure and Optical Properties of Lanthanum and Neodymium Pyrozirconates

Anatoliy A. Lavrentyev[1] ✉, **Boris V. Gabrelian**[1], **Vu Van Tuan**[2], **Ksenia F. Kalmykova**[1]

[1] Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation

[2] Institute for Computational Science and Artificial Intelligence, Van Lang University, Ho Chi Minh City, Vietnam

✉ alavrentyev@donstu.ru

Abstract

Introduction. Compounds with lanthanum and neodymium ($La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$) have low thermal conductivity, high permittivity and melting point, stability and resistance to defects. They can be used for thermal insulation of metal components in turbines and air engines. Also, these compounds are widely studied from the point of view of the development of materials science, particularly, for the improvement of laser technology and optics. However, the physical properties of $La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$ have not been sufficiently studied experimentally. This gap is intended to be filled by the presented study. The research objective includes model calculations of the electronic structure and optical properties of $La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$.

Materials and Methods. Based on model calculations within the framework of the density functional theory, the electron-energy structure of pyrozirconates $La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$, containing Zr and having the crystal structure of pyrochlore was investigated. The parameters of the crystal lattice of $La_2Zr_2O_7$ taken from the literature were used in the calculations. Due to the lack of experimental data, the parameters for $Nd_2Zr_2O_7$ were calculated by minimizing the forces acting on the atoms of the compound. A combined exchange-correlation potential was used, taking into account the strong interactions of *d*- and *f*-electrons of La and Nd atoms with a correction in the form of a modified Becke-Johnson meta-potential. Wien2K software package was used for the calculations.

Results. The densities of electron states of all atoms of the studied compounds were obtained. The calculated densities of valence electron states of the compounds were compared to the experimental X-ray photoelectron spectra. At zero energy, the optical characteristics of $La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$ were calculated. Firstly, it was the permittivity: for $La_2Zr_2O_7$ — 8.4334, for $Nd_2Zr_2O_7$ — 8.501; secondly, refraction: for $La_2Zr_2O_7$ — 2.904, for $Nd_2Zr_2O_7$ — 2.916; thirdly, reflection: for $La_2Zr_2O_7$ — 23.786%, for $Nd_2Zr_2O_7$ — 23.935%. High optical absorption coefficient ($>10^5$ cm^{-1}) was recorded in the ranges: from 5 to 14 eV, from 14 to 28 eV, and from 28 to 40 eV. Peak extinction values were in the ranges from 5 to 13 eV, from 14 to 28 eV, and from 28 to 40 eV. $La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$ crystals could absorb photons in a wide energy range (4–10 eV).

Discussion and Conclusion. The study supplemented the concept of the properties of $La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$ with new experimental data. The densities of electron states and optical spectra of $La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$ compounds were calculated. This made it possible to explain features of the experimental X-ray photoelectron spectra of the compounds. In the approximation of the modified Becke-Johnson potential, the values of the widths of the forbidden bands of the compounds corresponding to the experimental ones were obtained. The research is fundamental and can open up prospects for creating more efficient, reliable and functional materials, laser and optical devices.

Keywords: electron energy structure, properties of the pyrochlore group, modified Becke-Johnson meta-potential, optical properties of $La_2Zr_2O_7$ and $Nd_2Zr_2O_7$

Acknowledgments. The authors would like to thank the reviewers, whose critical evaluation of the submitted materials and suggestions for improvement contributed significantly to the quality of this article.

For Citation. Lavrentyev AA, Gabrelian BV, Vu Van Tuan, Kalmykova KF. *Ab initio* Calculations of the Electronic-Energy Structure and Optical Properties of Lanthanum and Neodymium Pyrozirconates. *Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don).* 2025;25(2):129–141. https://doi.org/10.23947/2687-1653-2025-25-2-129-141

Введение. Пироцирконаты лантана и неодима — $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ — относятся к группе пирохлоров. Общая формула этих материалов — $A_2B_2O_7$. А и В — металлические катионы, которые могут быть трехвалентными (как La и Nd), четырехвалентными (как Zr), двухвалентными и пятивалентными [1]. Пирохлоры обладают высокой диэлектрической проницаемостью, проявляют уникальные магнитные [2], химические, механические и электронные [3] свойства. Благодаря этому их можно использовать как:

– керамические покрытия термобарьеров, газовых сенсоров, металлооксидных транзисторов;
– твердые электролиты в топливных элементах [4];
– иммобилизационные носители актиноидов в ядерных отходах;
– катализаторы окислительных реакций [5];
– элементы магнитных устройств.

Научные изыскания, описанные в данной статье, проводились с учетом развития новых технологий в области лазерной техники, оптики и материаловедения [6]. Результаты работы могут открыть путь к созданию более эффективных, надежных и функциональных устройств [7]. Исследуемые сложные по химическому составу оксиды обладают значительной стабильностью, высокой температурой плавления, большим коэффициентом теплового расширения [8], низкой теплопроводностью, отличной ионной проводимостью и устойчивостью к дефектам [9]. С практической точки зрения важно применение пирохлоров $Ln_2Zr_2O_7$ в качестве покрытий для обеспечения тепловой изоляции металлических компонентов от горячих газов [10] в турбинах электрогенераторов морских судов и в воздушных двигателях авиалайнеров [11].

Во многих работах (например, в [12]) исследовались физические свойства пирохлоров, включая механические и тепловые. Вместе с тем некоторые их свойства очень трудно оценить и объяснить из-за сильной зависимости от стехиометрии образцов [10]. Расчеты электронно-энергетической структуры различных пирохлоров проводились в рамках теории функционала плотности (например, [13]). В этих расчетах использовались обменно-корреляционные потенциалы, полученные в приближении локальной плотности, обобщенного градиентного приближения, а также псевдопотенциалы.

В [13] отмечена важность коррекции в виде Хаббардовой поправки при расчете незаполненных *d*- и *f*-состояний тяжелых атомов [14]. Тем не менее даже с учетом поправки получаемая в расчетах ширина запрещенной зоны часто оказывается меньше, чем экспериментально наблюдаемая [15]. Нужно учесть дополнительные поправки, и именно так поступили авторы представленной работы.

Таким образом, дополнительные экспериментальные и теоретические исследования электронно-энергетической структуры и физических свойств пирохлоров вполне актуальны и имеют практическую значимость.

Рассмотрим кристаллическую структуру пирохлора $La_2Zr_2O_7$ (пространственная группа $Fd\text{-}3m$, Z = 8) с общей формулой $Ln_2^{3+}Zr_2^{4+}O1_6O2$ (O1 и O2 — атомы кислорода, расположенные в разных кристаллографических позициях). Ее можно описать как структуру дефектного флюорита, в которой катионы образуют гранецентрированную кубическую (*fcc*) решетку, а 1/8 часть позиций атомов кислорода не занята для обеспечения зарядовой нейтральности (рис. 1).

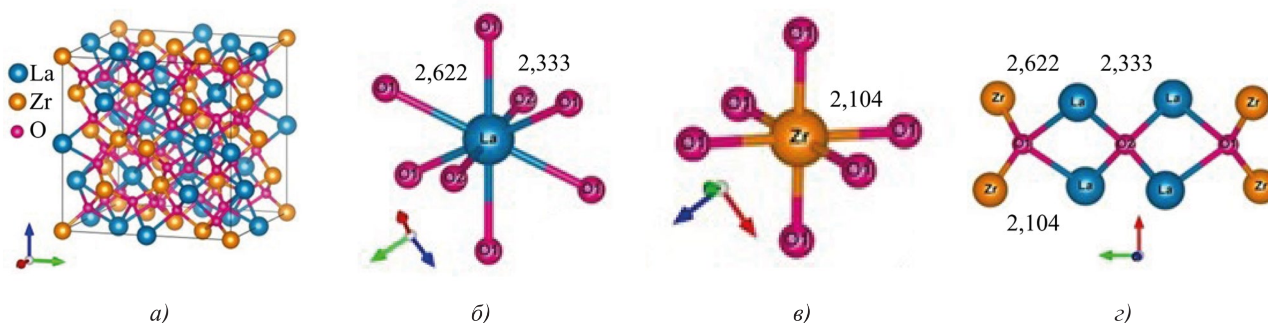


Рис. 1. Кристаллическая структура и ближайшее окружение атомов в пирохлоре $La_2Zr_2O_7$: *а* — элементная ячейка в соединении $La_2Zr_2O_7$; *б* — ближайшее окружение атома La; *в* — ближайшее окружение атома Zr; *г* — ближайшее окружение атомов кислорода O1 и O2. Расстояния между атомами даны в Å

Атомы в кристаллической структуре $La_2Zr_2O_7$ распределены по четырем уникальным кристаллографическим позициям:

– катионы La находятся в Вайкофф-позициях 16*d*;
– катионы Zr — в позициях 16*c*;
– кислород O1 — в позиции 48*f*;
– кислород O2 — в позиции 8*b*.

Позиции узлов 8*a* (1/8, 1/8, 1/8) не заняты вообще. Ионы кислорода O2 в узлах 8*b* (3/8, 3/8, 3/8) стабильны и тетраэдрически координируются катионами редкоземельного элемента La.

Ионы кислорода O1 в позициях 48*f* (*x*, 1/8, 1/8) смещены в сторону соседних пустых узлов 8*a* и окружены двумя катионами La и двумя катионами Zr (рис. 1) [16]. Ближайшее окружение катионов La составляют шесть атомов кислорода *O1* (позиции 48*f*) и два атома кислорода O2 (позиции 8*b*). Межатомное расстояние La-O2 меньше, чем расстояние La-O1. Катионы Zr (рис. 1) окружены шестью атомами O1 (позиции 48*f*), находящимися на эквивалентных расстояниях в тригональных антипризмах с точечной симметрией 3*m* (D_{3d}).

Кристаллические структуры соединений $Nd_2Zr_2O_7$ и $La_2Zr_2O_7$ совпадают. В таблице 1 приведены параметры кристаллической решетки исследованных пирохлоров $Ln_2Zr_2O_7$ (Ln = La, Nd) с пространственной группой *Fd*-3*m*, для которой $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. Для $La_2Zr_2O_7$ параметр *a* и координаты кислорода O1 взяты из работы [15], для $Nd_2Zr_2O_7$ рассчитаны. Рассчитывалась полная энергия кристалла с разными значениями *a* и определялось оптимальное значение, соответствующее минимуму полной энергии. Затем атомы кислорода смещались в пределах элементарной ячейки и определялось положение, для которого силы, действующие на атомы, становились минимальными.

Таблица 1

Параметры кристаллической структуры исследованных соединений

Соединение, параметр решетки	Символы Вайкоффа	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*
$La_2Zr_2O_7$ *a* = 10,793 Å [15]				
La	16*d*	0,50000	0,50000	0,50000
Zr	16*c*	0,00000	0,00000	0,00000
O1	48*f*	0,33002	0,12500	0,12500
O2	8*b*	0,37500	0,37500	0,37500
$Nd_2Zr_2O_7$ *a* = 10,6565 Å				
Nd	16*d*	0,50000	0,50000	0,50000
Zr	16*c*	0,00000	0,00000	0,00000
O1	48*f*	0,33520	0,12500	0,12500
O2	8*b*	0,37500	0,37500	0,37500

Таким образом, в научной литературе достаточно полно рассмотрены некоторые физические свойства пирохлоров, а также структура соединений $Nd_2Zr_2O_7$ и $La_2Zr_2O_7$. Однако физические свойства $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ недостаточно экспериментально изучены. Этот пробел призвано восполнить представленное исследование. Цель работы — модельные расчеты электронной структуры и оптических свойств $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$.

Материалы и методы. Выполнены *ab initio* расчеты электронно-энергетической структуры (ЭЭС) $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ в рамках теории функционала плотности. Применялся метод присоединенных плоских волн с добавлением локальных орбиталей *APW+lo*. Для реализации задействовали программный пакет *WIEN2k* [17], в котором используется полный потенциал, не имеющий предопределенной формы, как, например, *muffin-tin* потенциал.

При построении присоединенной плоской волны применили разложение по *l* внутри атомной сферы до $l_{max} = 10$. В настоящих расчетах использовались следующие радиусы атомных сфер: $R_{(La)} = 2{,}24$ *a.u.*, $R_{(Nd)} = 2{,}26$ *a.u.*, $R_{(Zr)} = 1{,}96$ *a.u.*, $R_{(O)} = 1{,}78$ *a.u.* (1 *a.u.* = 0,529117 Å). Ряд разложения по плоским волнам обрывался на значениях волнового вектора, определяемых по соотношению $R^{MT}_{min}k_{max} = 7$, где R_{min} — радиус минимальной атомной сферы. Зарядовая плотность разлагалась в ряд Фурье до величины $G_{max} = 12\ (a.u)^{-1}$. Плотности электронных состояний получались интегрированием по 1 000 $\vec{k}$ точек в неприводимой зоне Бриллюэна (BZ) методом тетраэдров [18]. Процедура самосогласования проводилась до тех пор, пока не становилось меньше величины $q \le 0{,}0001$ изменение интегрального заряда $q = \int|\rho_n - \rho_{n-1}|dr$. Здесь $\rho_{n-1}(r)$ и $\rho_n(r)$ — электронные плотности, полученные на итерациях *n*–1 и *n* соответственно.

Для расчета обменно-корреляционного потенциала использовались:

– приближение обобщенного градиента (англ. generalized gradient approximation, *GGA*) в параметризации, предложенной авторами [19];

– модифицированный потенциал Беке-Джонсона (англ. modified Becke -Johnson, *mBJ* [20]).

В дополнение к вышеуказанным обменно-корреляционным потенциалам в расчетах ЭЭС учитывалось сильное кулоновское взаимодействие *f*-электронов на одном узле Nd [21] в приближении *PBE+U* [22] с *U* = 5*eV*. Таким образом, в окончательном варианте использовались модели обменно-корреляционного потенциала *PBE+U и mBJ+U* [23].

В $Nd_2Zr_2O_7$ имеется недостроенная 4*f*-оболочка с четырьмя *f*-электронами, поэтому проводили спин-поляризованный расчет ЭЭС. Для атомов La, Nd и Zr учитывалось спин-орбитальное взаимодействие (англ. spin-orbit coupling, SOC). Оно приводит к расщеплению:

– 5*p*-состояний La и Nd на состояния $5p_{1/2}$ и $5p_{3/2}$;

– $4p^6$-состояний Zr на состояния $4p_{1/2}$ и $4p_{3/2}$.

Результаты исследования. В работе рассчитаны полные и парциальные плотности электронных состояний (ППС, англ. density of electron states, DOS). В атоме La нет *f*-электронов, а в атоме Nd — четыре *f*-электрона. Несмотря на это различие, в первом приближении рассчитанные полные плотности электронных состояний и экспериментальные рентгеновские фотоэлектронные спектры валентных полос исследованных соединений демонстрируют похожую структуру — четыре области, отражающие вклады *s*-, *p*-, *d*- и *f*-электронов разных элементов [23].

Данные, приведенные на рис. 2, позволяют сравнить экспериментальный рентгеновский фотоэлектронный спектр (англ. X-ray photoelectron spectrum, *XPS*) с рассчитанными полными и парциальными плотностями *DOS* для соединения $La_2Zr_2O_7$, а рис. 3–5 — для $Nd_2Zr_2O_7$. Ноль шкалы энергии соответствует вершине валентной полосы E_V. Спектры получены в Институте проблем материаловедения имени И.Н. Францевича Национальной академии наук Украины (г. Киев). Особенности эксперимента и оборудование описаны в работе [24].

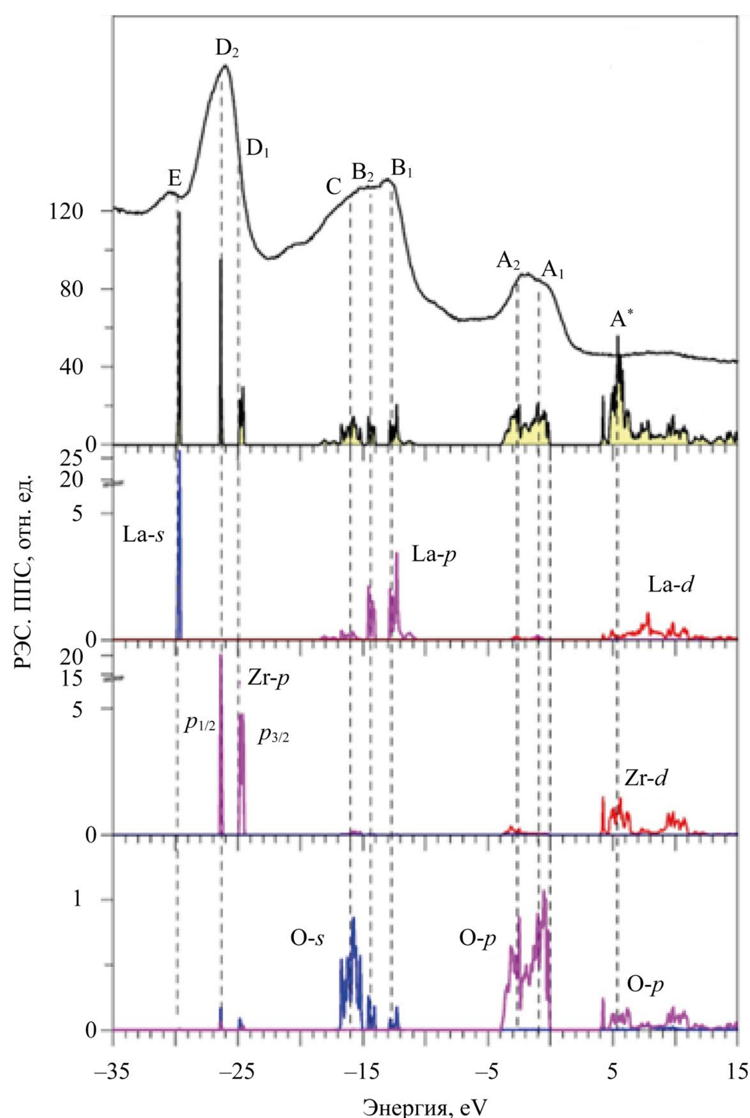


Рис. 2. Рассчитанные в приближении *GGA–PBE–SOC* полная и парциальные плотности электронных состояний (ППС) в сравнении с экспериментальным рентгеновским фотоэлектронным спектром (РЭС) валентной полосы соединения $La_2Zr_2O_7$

На рис. 2 в соединении $La_2Zr_2O_7$ представлена область 1 — верхняя часть валентной полосы от 0 до 4 эВ. Эта область формируется в основном 2*p*-состояниями кислорода с небольшой примесью 4*d*-состояний Zr, 5*s*-состояний Zr, а также 6*s*- и 5*d*-состояний La.

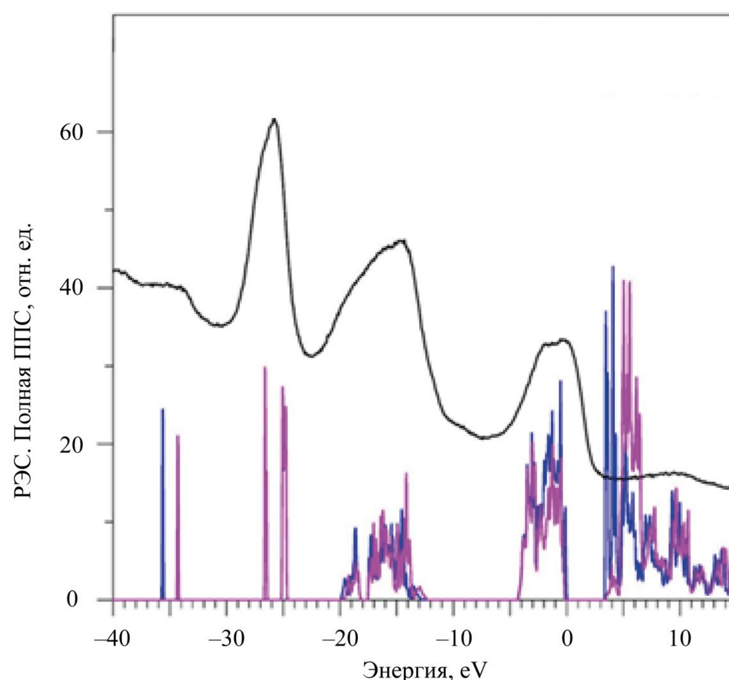


Рис. 3. Рассчитанные в приближении *GGA–PBE+U+SOC* полные плотности электронных состояний (ППС) со спином вверх и спином вниз в сравнении с экспериментальным рентгеновским фотоэлектронным спектром (РЭС)

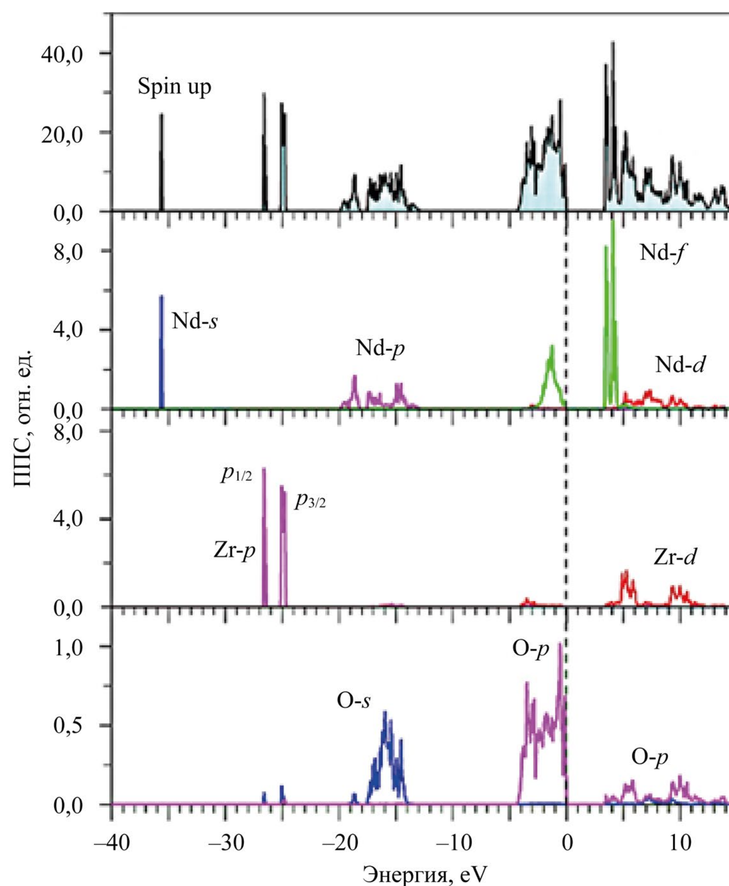


Рис. 4. Рассчитанные в приближении *GGA–PBE+U+SOC* полная и парциальные плотности (ППС) электронных состояний для спина вверх (spin up) в $Nd_2Zr_2O_7$

Здесь в $Nd_2Zr_2O_7$ у вершины валентной полосы располагаются *f*-состояния Nd со спином вверх. Рентгеновский фотоэлектронный спектр (*XPS*) подтверждает расчет. Видно, что самый близкий к вершине валентной полосы широкий пик с элементами A_1 и A_2 в $La_2Zr_2O_7$ и *A* в $Nd_2Zr_2O_7$ соответствует 2*p*-состояниям атомов кислорода O1 и O2.

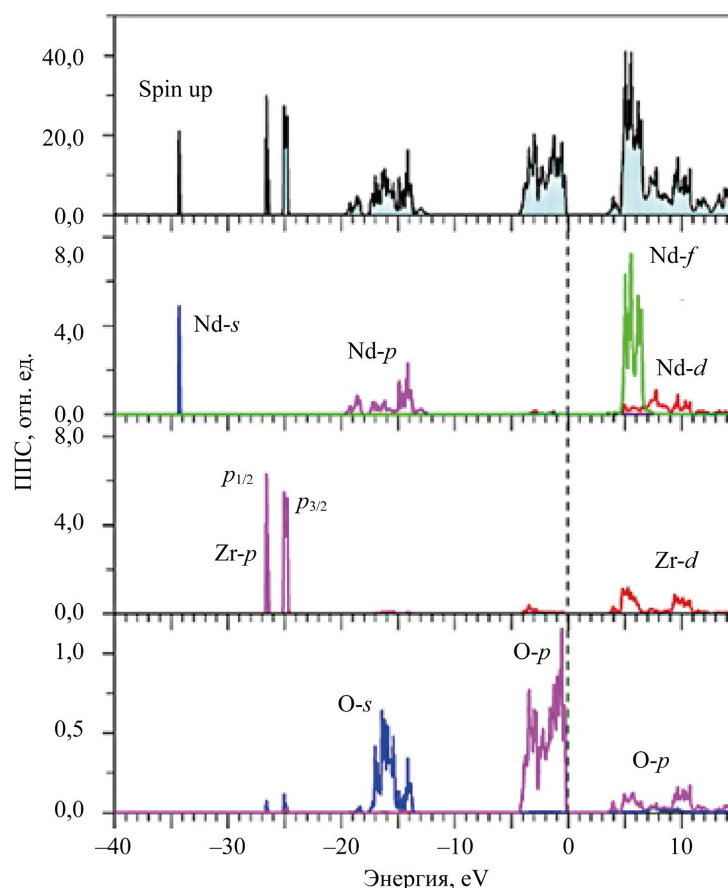


Рис. 5. Рассчитанные в приближении *GGA–PBE+U+SOC* полная и парциальные плотности электронных состояний (ППС) для спина вниз (spin down) в $Nd_2Zr_2O_7$

В областях 2, 12–18 эВ от E_v на *XPS* имеется также широкий пик с особенностями B_1, B_2 и C для $La_2Zr_2O_7$ и B для $Nd_2Zr_2O_7$. Теоретический расчет показывает всю тонкую структуру, которая формирует пик на *XPS*. $5p^6$-состояния La и Nd расщеплены на состояния $5p_{1/2}$- и $5p_{3/2}$. Это расщепление проявляется уже в свободных атомах La и Nd [25].

Спин-орбитальное расщепление в свободном атоме присутствует и в твердом теле (рис. 2) на третьей панели снизу для парциальных состояний La. Именно спин-орбитальное расщепление 5*p*-состояний La приводит к расщеплению 2*s*-состояний кислорода. Это хорошо видно на самой нижней панели рис. 2, где приведены парциальные состояния кислорода. Как видно из рис. 2, в энергетической области ~12–18 эВ глубоколежащие 5*p*-состояния La взаимодействуют с 2*s*-состояниями кислорода. Такое взаимодействие глубоколежащих состояний в твердом теле необычно и связано прежде всего:

– со спин-орбитальным расщеплением 5*p*-состояний *La*;

– с тем, что 2*s*-волновая функция кислорода пространственно и энергетически сильно растянута.

Наличие элементов структуры B_1, B_2 и C на рентгеновском фотоэлектронном спектре хорошо совпадает с расчетами пика на парциальных плотностях электронных состояний La и O.

Третья область энергий (от 24 до 27 эВ) от E_v — пики D_1 и D_2 на рентгеновском фотоэлектронном спектре $La_2Zr_2O_7$, C — на спектре $Nd_2Zr_2O_7$. Эта область соответствует 4*p*-состояниям Zr, которые расщепляются в атоме на:

– $4p_{1/2}$-состояние с энергией 35 эВ (N_2);

– $4p_{3/2}$-состояния с энергией 33 эВ (N_3).

На кривой *XPS* $La_2Zr_2O_7$ расщепление 4*p*-состояний *Zr* проявляется в виде асимметрии линий с элементами D_1 и D_2.

Самые глубоколежащие состояния валентных полос $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ — это уже полуостовные состояния). Четвертая область энергий на *XPS*-спектре (небольшой пик *E* на рис. 2, 3) — это 5*s*-состояния La и Nd. Отметим, что La 5*s*-состояния в $La_2Zr_2O_7$ не расщеплены по сравнению с 5*s*-состояниями Nd с разными направлениями спина (рис. 3). Расщепление 5*s*-состояний Nd для спина вверх и спина вниз происходит под действием внутреннего магнитного поля. Оно создается четырьмя 4*f*-электронами, которые выстраиваются одинаково со спином вверх по правилу Хунда [26]. Широкий наплыв *D* на *XPS*-спектре (рис. 3) соответствует расщепившимся в теоретическом расчете 5*s*-состояниям Nd.

Энергетическое распределение электронных состояний в валентной полосе $La_2Zr_2O_7$ хорошо коррелирует со значениями электроотрицательности (ЭО) элементов [27], входящих в это соединение (таблица 2).

Таблица 2

Электроотрицательность элементов, входящих в исследуемые соединения [27]

Элемент	O	Zr	La	Nd	Sm	Eu	Gd
ЭО	3,44	1,33	1,10	1,14	1,17	1,20	1,20

Итак, самая большая ЭО у кислорода (3,44), поэтому вполне закономерно, что верхняя часть валентной полосы формируется 2*p*-состоянием O. Примешивание к 2*p*-состояниям кислорода 4*d*- и 5*s*- состояний Zr незначительное, поскольку связь Zr-O1 имеет преимущественно ионный характер. Электроотрицательность кислорода (ЭО = 3,44) значительно выше Zr (ЭО = 1,33) За счет этого, по-видимому, происходит оттягивание 4*d*- и 5*s*-электронной плотности Zr к атому кислорода (O1), что характерно для октаэдрического окружения атома Zr атомами *O*1. В окружении атома *La* также имеется 6 атомов O1. Электроотрицательность La (ЭО = 1,1) значительно меньше $ЭО^S$ = 3,44. Примешивание 5*d*- и 6*s*-состояний La почти не наблюдается. Связь атомов La и O1 носит преимущественно ионный характер, доля ковалентности в этой связи весьма небольшая.

Дно полосы проводимости в обоих соединениях формируется в основном незанятыми *f*- и *d*-состояниями La/Nd, а также *d*-состояниями Zr (рис. 2, 4, 5).

Известной проблемой расчетов, использующих обменно-корреляционный потенциал в *GGA*-приближении, является приуменьшение получаемого значения ширины запрещенной полосы. Для некоторых непроводящих соединений расчеты дают даже проводящее состояние или, как в случае $Nd_2Zr_2O_7$ в данном расчете, нулевое значение ширины запрещенной полосы. Учет сильного взаимодействия *f*-электронов в атоме Nd, например в рамках приближения *LDA+U* (или *GGA+U*) в расчетах ЭЭС $Nd_2Zr_2O_7$, приводит к появлению небольшой запрещенной полосы, но близкое к экспериментальным значение можно получить либо в схемах расчета, учитывающих многоэлектронные явления, либо при использовании гибридных или метапотенциалов, таких как модифицированный потенциал Беке-Джонсона (*mBJ*) [28].

В таблице 3 даны значения ширин запрещенных полос E_g. Их рассчитали с учетом спин-орбитального расщепления (*SOC*) электронных состояний в атомах La и Nd в приближениях *GGA–PBE* для $La_2Zr_2O_7$ (*GGA–PBE+SOC*) и *GGA+PBE+U+SOC* (с $U = 5eV$ для 4*f*-состояний Nd) для $Nd_2Zr_2O_7$.

Таблица 3

Рассчитанные значения ширин запрещенных полос E_g

Соединение	Обменно-корреляционный потенциал	E_g, eV
$La_2Zr_2O_7$	*GGA–PBE+SOC*	3,928
$Nd_2Zr_2O_7$	*GGA–PBE+U+SOC*	3,393

Комплексная диэлектрическая функция $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ — наиболее важная характеристика для расчета оптического отклика материалов на электромагнитное воздействие. Диэлектрическая функция, в принципе, должна включать в себя как переходы между зонами, так и переходы в пределах зоны. Межзонные переходы разделяются на прямые и непрямые. В данных расчетах игнорируются два фактора. Первый — внутризонные переходы, так как они важны для металлов, а исследуемые соединения — полупроводники. Второй — вклады фононов и других квазичастиц, включенных в непрямые межзонные переходы. Рассматриваются только прямые переходы между занятыми и незанятыми состояниями. Кубическая симметрия кристаллической структуры пирохлора определяет только три ненулевых (диагональных) элемента диэлектрического тензора, причем значения всех этих трех элементов одинаковы.

Рассчитанные кривые действительной $\varepsilon_1(\omega)$ и мнимой $\varepsilon_2(\omega)$ частей диэлектрической проницаемости для $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ приведены на рис. 6.

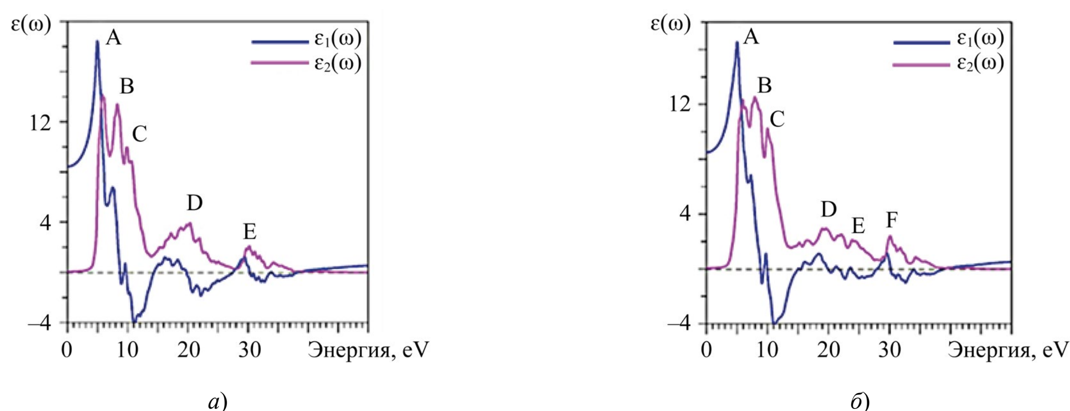


Рис. 6. Рассчитанные действительная (ε_1) и мнимая части диэлектрической проницаемости: *а* — $La_2Zr_2O_7$; *б* — $Nd_2Zr_2O_7$

Спектральные пики поглощающей части диэлектрической функции соответствуют разрешенным дипольным переходам между валентной зоной и зоной проводимости. Для идентификации элементов тонкой структуры необходимо сравнить величины оптических матричных элементов. Наблюдаемые структуры будут соответствовать тем переходам, которые имеют большие значения оптических матричных дипольных элементов перехода. При расчете $\varepsilon_2(\omega)$ учитывались только дипольные переходы внутри атома, т.е. без перекрестных переходов. Интерпретация пиков *A*, *B*, *C*, *D*, *E*, *F* на рис. 6 для $\varepsilon_2(\omega)$ приведена в таблице 4.

Таблица 4

Интерпретация основных максимумов $\varepsilon_2(\omega)$

Соединение	Пик	Энергия, eV	Атом	Переход
$La_2Zr_2O_7$	*A*	≈ 5	O	$p \rightarrow s(d)$
	B	≈ 8	O	$p \rightarrow s$
	C	≈ 10	O	$p \rightarrow s$
	D	≈ 20	O La	$p \rightarrow s$ $5p \rightarrow d$
	E	≈ 30	Zr	$4p \rightarrow d$
$Nd_2Zr_2O_7$	*A*	5,07	O	$p \rightarrow s$
	B	7,8	O	$p \rightarrow s$
	C	10,2	O	$p \rightarrow s$
	D *E*	19,09 24,02	O Nd	$p \rightarrow s$ $5p \rightarrow d$
	F	30,11	Zr	$4p \rightarrow d$

На рис. 6 отражен процесс, когда электроны *p*-симметрии в верхней части валентной полосы (пик *A* на *XPS*) переходят к состояниям *s*- и *d*-симметрии в зоне проводимости атома кислорода. Так сформировался самый высокий пик кривой мнимой части диэлектрической функции $\varepsilon_2(\omega)$, охватывающей диапазон 5–8 эВ.

Второй и третий по высоте пики кривой $\varepsilon_2(\omega)$ — *B* и *C* с энергиями 8,28 и 9,86 эВ соответственно. Они обусловлены переходами валентных *p*-электронов кислорода на свободные состояния *s*-симметрии кислорода. Рассмотрим широкий максимум *D* на кривой $\varepsilon_2(\omega)$. Частокол из небольших дополнительных пиков появился за счет переходов электронов *s*-симметрии кислорода на свободные состояния *p*-симметрии кислорода. Кроме того, в пике *D* (энергия ~20 эВ), есть вклад переходов валентных 5*p*-электронов La на свободные в зоне проводимости *d*-состояния La. Наконец, небольшой пик *E* (энергия ~30 эВ) соответствует переходу валентных 4*p*-электронов *Zr* на незанятые *d* состояния Zr. При нулевой энергии рассчитанное значение $\varepsilon_2(0)$ для $La_2Zr_2O_7$ равно 8,4334, а для $Nd_2Zr_2O_7$ — 8,501.

Все другие оптические свойства могут быть выведены из $\varepsilon_1(\omega)$ и $\varepsilon_2(\omega)$. Это, например: коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$, показатель преломления $n(\omega)$, коэффициент экстинкции $k(\omega)$, оптический коэффициент отражения $R(\omega)$ и спектр энергетических потерь $L(\omega)$ [28].

Высокий оптический коэффициент поглощения $\alpha(\omega) > 10^5$ см$^{-1}$ [29] фиксируется в трех ярко выраженных областях: от 5 до 14 эВ, от 14 до 28 эВ и от 28 до 40 эВ (рис. 7). По-видимому, такое поглощение может указывать на перспективность использования тонкопленочных элементов из $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$.

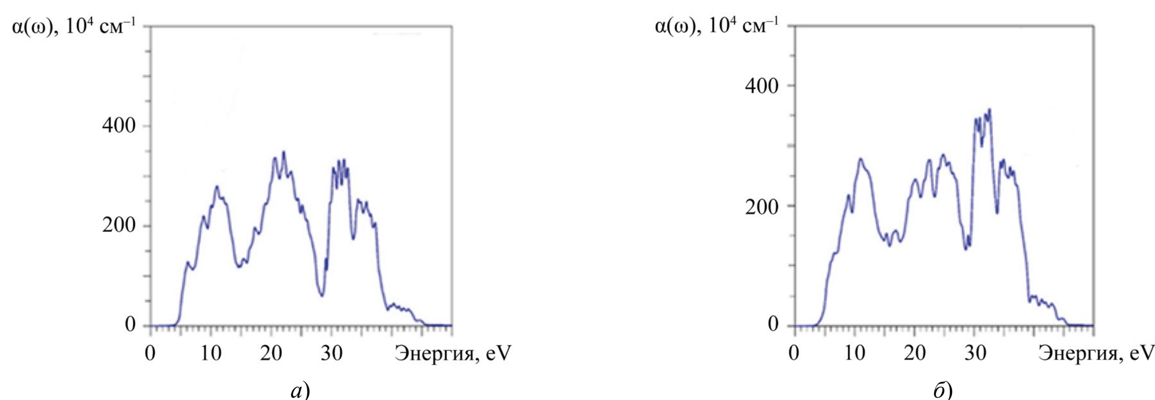


Рис. 7. Рассчитанный коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$: *а* — $La_2Zr_2O_7$; *б* — $Nd_2Zr_2O_7$

Информатика, вычислительная техника и управление

Кроме того, спектр оптического поглощения характеризуется большим количеством пиков. Они формируются благодаря переходам между занятыми уровнями валентной зоны и свободными уровнями зоны проводимости, разрешенными правилами отбора ($\Delta l \neq 0$) и относящимися к одному атому (перекрестные переходы между соседними атомами маловероятны). Такой частокол небольших пиков на кривой $a(\omega)$, несомненно, связан с особенностями описанного выше электронно-энергетического строения $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$. Вероятно, его нужно учесть при использовании этих соединений в оптоэлектронике.

Комплексный показатель преломления $N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ можно получить из комплексной диэлектрической функции $\varepsilon(\omega)$, причем показатель преломления $n(\omega)$ зависит в основном от действительной части $\varepsilon_1(\omega)$, а коэффициент экстинкции $k(\omega)$ — от мнимой части диэлектрической функции $\varepsilon_2(\omega)$ [30].

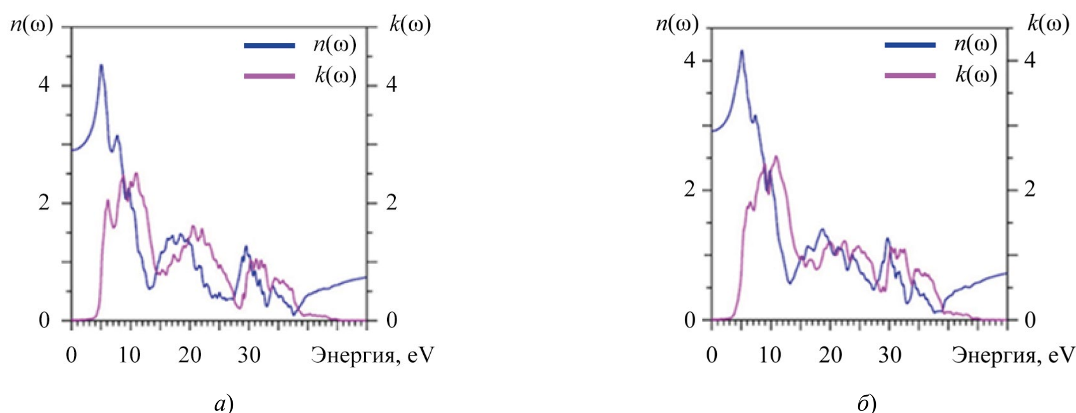


Рис. 8. Рассчитанные показатель преломления $n(\omega)$ и коэффициент экстинкции $k(\omega)$:
а — $La_2Zr_2O_7$; *б* — $Nd_2Zr_2O_7$

При нулевой энергии рассчитанное значение $n(0)$ (статический показатель преломления) для $La_2Zr_2O_7$ равно 2,904, а для $Nd_2Zr_2O_7$ — 2,916.

Коэффициент экстинкции $k(\omega)$, ответственный за поглощение падающей на кристалл электромагнитной волны, получен из мнимой части диэлектрической функции $\varepsilon_2(\omega)$ (рис. 6), поэтому здесь имеются также три области, где величина $k(\omega)$ возрастает от 5 до 13 эВ, от 14 до 28 эВ и от 28 до 40 эВ. Затухание интенсивности, представленное коэффициентом экстинкции $k(\omega)$, начинается с уменьшением функции $n(\omega)$ (рис. 8). Кристаллы $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ могут поглощать фотоны в широком диапазоне энергий (4–10 эВ).

В целом, коэффициент экстинкции $La_2Zr_2O_7$ и $Nd_2Zr_2O_7$ не является изотропным и имеет три хорошо выраженные области (энергии указаны выше), где не наблюдается изотропное поведение $k(\omega)$. В этих областях различие значений $k(\omega)$ составляет 25–50 %.

Коэффициент отражения $R(\omega)$ показан на рис. 9. Спектр $R(\omega)$ состоит из трех ярко выраженных энергетических областей. Эта же особенность отмечалась для других оптических характеристик. При нулевой энергии рассчитанное значение $R(0)$ для $La_2Zr_2O_7$ равно 23,786 %, а для $Nd_2Zr_2O_7$ — 23,935 %.

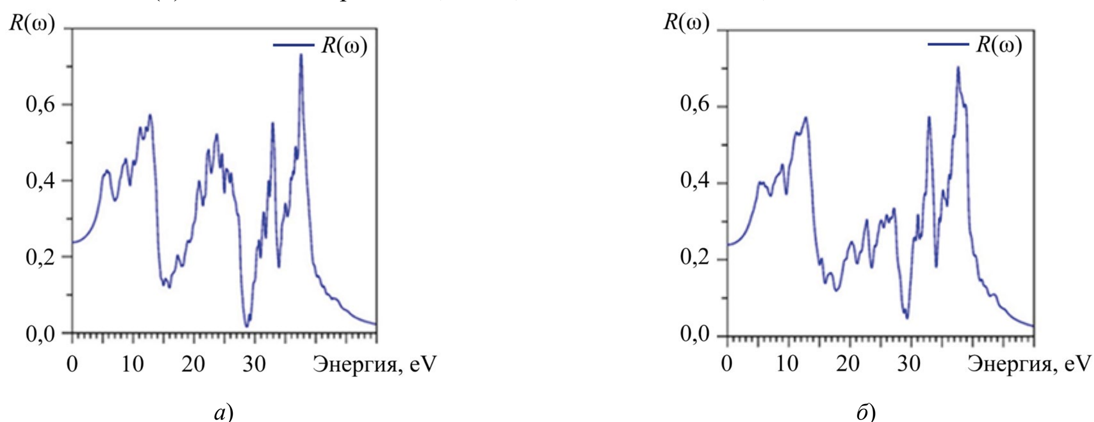


Рис. 9. Рассчитанный коэффициент отражения $R(\omega)$: *а* — $La_2Zr_2O_7$; *б* — $Nd_2Zr_2O_7$

Из рис. 8 видно, что не поглощаются падающие фотоны с энергией, меньшей, чем энергия запрещенной щели (~4 эВ). Фотоны с энергией от 4 эВ до~40 эВ поглощаются кристаллами $La_2Zr_2O_7$, $Nd_2Zr_2O_7$ и возбуждают электроны в зоне проводимости, а в валентной зоне образуются положительно заряженные дырки. Однако часть энергии фотона будет потеряна при термализации, и ее отражает спектр энергетических потерь электрона $L(\omega)$, приведенный на рис. 10.

https://vestnik-donstu.ru

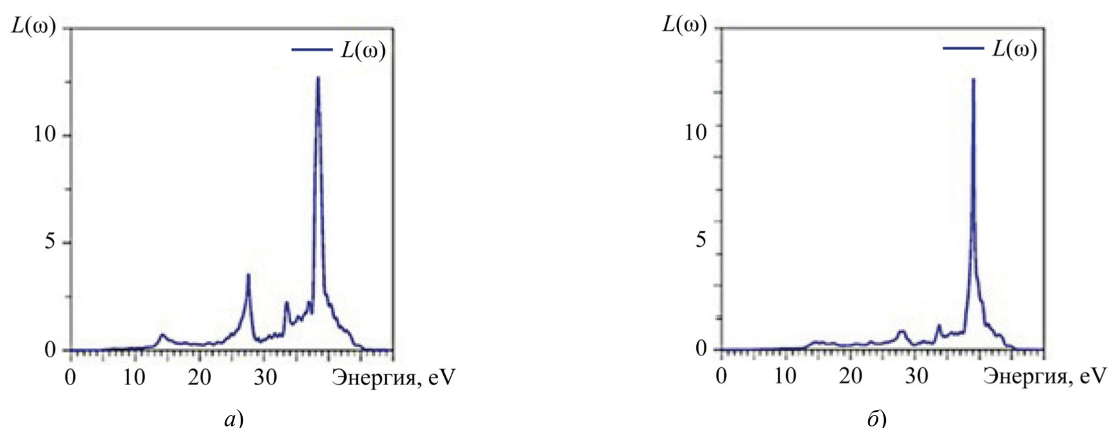


Рис. 10. Рассчитанный спектр энергетических потерь электрона: *а* — $La_2Zr_2O_7$; *б* — $Nd_2Zr_2O_7$

Потери энергии электроном становятся значительными при 14 эВ (маленький пик),~27 эВ,~33,5 эВ. Наибольшая величина $R(\omega)$ достигается при 39 эВ, что соответствует резко понижающему краю коэффициента поглощения $a(\omega)$ (рис. 7).

Обсуждение и заключение. Расчет плотностей электронных состояний валентных полос $La_2Zr_2O_7$, $Nd_2Zr_2O_7$ дал два результата:

– позволил объяснить все основные особенности экспериментальных рентгеновских фотоэлектронных спектров этих соединений в области энергий ~35 eV от вершины валентной полосы;

– показал, электроны какой симметрии определили основные особенности экспериментальных спектров.

Вместе с полученными плотностями незанятых состояний рассчитанные плотности занятых состояний позволили вычислить оптические коэффициенты исследованных соединений. Крайне важно учитывать поправки в обменно-корреляционной части потенциала (*GGA+U*, *mBJ*). Только с ними удается получить значения ширин запрещенных полос, соответствующие экспериментальным данным. Для $Nd_2Zr_2O_7$ расчеты без поправок вообще показывают отличную от нуля плотность состояний на уровне Ферми.

Список литературы / References

1. Chartier A, Meis C, Crocombette J, Corrales LR, Weber WJ. Atomistic Modeling of Displacement Cascades in $La_2Zr_2O_7$ Pyrochlore. *Physical Review B*. 2003;67:174102. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.174102

2. Stanek CR, Minervini L, Grimes RW. Nonstoichiometry in $A_2B_2O_7$ Pyrochlores. *Journal of the American Ceramic Society*. 2002;85(11):2792–2798. https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.2002.tb00530.x

3. Pirzada M, Grimes RW, Minervini L, Maguire JF, Sickafus KE. Oxygen Migration in $A_2B_2O_7$ Pyrochlores. *Solid State Ionics*. 2001;140:201–208. https://doi.org/10.1016/S0167-2738(00)00836-5

4. Tabira Y, Withers RL, Minervini L, Grimes RW. Systematic Structural Change in Selected Rare Earth Oxide Pyrochlores as Determined by Wide-Angle CBED and a Comparison with the Results of Atomistic Computer Simulation. *Journal of Solid State Chemistry*. 2000;153(1):16–25. https://doi.org/10.1006/jssc.2000.8712

5. Helean KB, Ushakov SV, Brown CE, Navrotsky A, Lian J, Ewing RC, et al. Formation Enthalpies of Rare Earth Titanate Pyrochlores. *Journal of Solid State Chemistry*. 2004;177(6):1852–1866. https://doi.org/10.1016/j.jssc.2004.01.009

6. Lian J, Zu XT, Kutty KVG, Chen J, Wang LM, Ewing RC. Ion-Irradiation-Induced Amorphization of $La_2Zr_2O_7$ Pyrochlore. *Physical Review B*. 2002;66:054108. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.054108

7. Chen J, Lian J, Wang LM, Ewing RC, Wang RG, Pan W. X-ray Photoelectron Spectroscopy Study of Disordering in $Gd_2(Ti_{1-x}Zr_x)_2O_7$ Pyrochlores. *Physical Review Letters*. 2002;88:105901. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.105901

8. Yong Jiang, Smith JR, Odette GR. Prediction of Structural, Electronic and Elastic Properties of $Y_2Ti_2O_7$ and Y_2TiO_5. *Acta Materialia*. 2010;58(5):1536–1543. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.10.061

9. Winter MR, Clarke DR. Thermal Conductivity of Yttria-Stabilized Zirconia-Hafnia Solid Solutions. *Acta Materialia*. 2006;54(19):5051–5059. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2006.06.038

10. Matteucci F, Cruciani G, Dondi M, Baldi G, Barzanti A. Crystal Structural and Optical Properties of Cr-Doped $Y_2Ti_2O_7$ and $Y_2Sn_2O_7$ Pyrochlores. *Acta Materialia*. 2007;55(7):2229–2238. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2006.11.008

11. Uno M, Kosuga A, Okui M, Horisaka K, Muta H, Kurosaki K, et al. Photoelectrochemical Study of Lanthanide Zirconium Oxides, $Ln_2Zr_2O_7$ (Ln = La, Ce, Nd and Sm). *Journal of Alloys and Compounds*. 2006;420:291–297. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2005.10.072

12. Ciomaga Hatnean M, Lees MR, Balakrishnan G. Growth of Single-Crystals of Rare-Earth Zirconate Pyrochlores, $Ln_2Zr_2O_7$ (with Ln = La, Nd, Sm, and Gd) by the Floating Zone Technique. *Journal of Crystal Growth*. 2015;418:1–6. https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2015.01.037

13. Feng J, Xiao B, Wan CL, Qu ZX, Huang ZC, Chen JC, et al. Electronic Structure, Mechanical Properties and Thermal Conductivity of $Ln_2Zr_2O_7$ (Ln = La, Pr, Nd, Sm, Eu and Gd) Pyrochlore. *Acta Materialia*. 2011;59(4):1742–1760. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.11.041

14. Zheng Li, Wei Pan. Electronic Structure and Transport Properties of $La_2Zr_2O_7$ Pyrochlore from First Principles. *Solid State Phenomena*. 2018;281:767–773. https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.281.767

15. Liu B, Wang JY, Zhou YC, Liao T, Li FZ. Theoretical Elastic Stiffness, Structure Stability and Thermal Conductivity of $La_2Zr_2O_7$ Pyrochlore. *Acta Materialia*. 2007;55(9):2949–2957. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2006.12.035

16. Subramanian MA, Aravamudan G, Subba Rao GV. Oxide Pyrochlores — A Review. *Progress in Solid State Chemistry*. 1983;15(2):55–143. https://doi.org/10.1016/0079-6786(83)90001-8

17. Blaha P, Schwarz K, Tran F, Laskowski R, Madsen GKH, Marks LD. WIEN2k: an APW+lo Program for Calculating the Properties of Solids. *Journal of Chemical Physics*. 2020;152(7):074101. https://doi.org/10.1063/1.5143061

18. Blöchl PE, Jepsen O, Andersen OK. Improved Tetrahedron Method for Brillouin-Zone Integrations. *Physical Review B*. 1994;49(23):16223–16233. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.16223

19. Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*. 1996;77(18):3865–3868. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865

20. Tran F, Blaha P. Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential. *Physical Review Letters*. 2009;102(22):226401. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.226401

21. Anisimov VI, Solovyev IV, Korotin MA, Czyżyk MT, Sawatzky GA. Density-Functional Theory and NiO Photoemission Spectra. *Physical Review B*. 1993;48(23):16929–16934. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.16929

22. Novák P, Boucher F, Gressier P, Blaha P, Schwarz K. Electronic Structure of the Mixed Valence System $(YM)_2BaNiO_5$ (M = Ca, Sr). *Physical Review B*. 2001;63(23):235114. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.235114

23. Hong Jiang. Band Gaps from the Tran-Blaha Modified Becke-Johnson Approach: A Systematic Investigation. *The Journal of Chemical Physics*. 2013;138(13):134115. https://doi.org/10.1063/1.4798706

24. Tuan V Vu, Khyzhun OY, Lavrentyev AA, Gabrelian BV, Kalmykova KF, Isaenko LI, et al. Electronic Band Structure and Optical Properties of $Li_2In_2GeSe_6$ Crystal. *Materials Today Communications*. 2023;35:105798. https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105798

25. Lotz W. Electron Binding Energies in Free Atoms. *The Journal of the Optical Society of America*. 1970:60(2):206–210.

26. Lide DR (ed). *CRS Handbook of Chemistry and Physics*. 87th ed. Boca Raton; London; New York: CRC Press; Taylor & Francis; 2007. 2608 p.

27. Ambrosch-Draxl C, Sofo JO. Linear Optical Properties of Solids within the Full-Potential Linearized Augmented Planewave Method. *Computer Physics Communications*. 2006;175(1):1–14. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2006.03.005

28. Khan SA, Reshak AH. Optoelectronic and Transport Properties of Zintl Phase $KBa_2Cd_2Sb_3$ Compound. *Computational Materials Science*. 2014;95:328–336. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.07.031

29. Boujnah M, Dakir O, Zaari H, Benyoussef A, Kenz AE. Optoelectronic Response of Spinels CdX2O4 with X = (Al, Ga, In) through the Modified Becke-Johnson Functional. *Journal of Applied Physics*. 2014;116(12):123703. https://doi.org/10.1063/1.4896110

30. Tuan V Vu, Lavrentyev AA, Doan V Thuan, Chuong V Nguyen, Khyzhun OY, Gabrelian BV, et al. Electronic Properties and Optical Behaviors of Bulk and Monolayer ZrS_2: A Theoretical Investigation. *Superlattices and Microstructures*. 2019;125:205–213. https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.11.008

Об авторах:

Анатолий Александрович Лаврентьев, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий, кафедра «Электротехника и электроника» Донского государственного технического университета (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), SPIN-код, ORCID, ScopusID, ResearchGate, alavrentyev@donstu.ru

Борис Витальевич Габрельян, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем» Донского государственного технического университета (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), SPIN-код, ORCID, ScopusID, ResearcherID, boris.gabrelian@gmail.com

Ву Ван Туан, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, «Лаборатория вычислительной физики» института вычислительной науки и искусственного интеллекта, Университет Ван Ланг, Хошимин, Вьетнам, ORCID, ScopusID, vuvan.tuan@mail.ru

Ксения Федоровна Калмыкова, ассистент, кафедра «Электротехника и электроника» Донского государственного технического университета (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), SPIN-код, ORCID, ScopusID, ResearchGate, 16ksy16@mail.ru

Заявленный вклад авторов:
А.А. Лаврентьев: разработка концепции, научное руководство, административное руководство исследовательским проектом.
Б.В. Габрельян: разработка методологии, формальный анализ, курирование данных, валидация результатов.
Ву Ван Туан: предоставление ресурсов, валидация результатов, написание черновика рукописи.
К.Ф. Калмыкова: формальный анализ, написание рукописи.

Конфликт интересов: **авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.**

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

About the Authors:
Anatoliy A. Lavrentyev, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Head of the Electrical Engineering and Electronics Department, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation), SPIN-code, ORCID, ScopusID, ResearchGate, alavrentyev@donstu.ru

Boris V. Gabrelian, Cand.Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Computer and Automated Systems Software Department, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation), SPIN-code, ORCID, ScopusID, ResearcherID, boris.gabrelian@gmail.com

Vu Van Tuan, Cand.Sci. (Phys.-Math.), Leading Researcher, Laboratory of Computational Physics, Institute of Computational Science and Artificial Intelligence, Van Lang University (69/68, Dang Thuy Tram Str. Ward 13, Binh Thanh District, Ho Chi Minh City, 70000, Vietnam), ORCID, ScopusID, vuvan.tuan@mail.ru

Ksenia F. Kalmykova, Teaching Assistant of the Electrical Engineering and Electronics Department, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation), SPIN-code, ORCID, ScopusID, ResearchGate, 16ksy16@mail.ru

Claimed Contributorship:
AA Lavrentyev: conceptualization, supervision, project administration.
BV Gabrelian: methodology, formal analysis, data curation, validation.
Vu Van Tuan: resources, validation, writing – original draft preparation.
KF Kalmykova: formal analysis, writing – review and editing.

Conflict of Interest Statement: **the authors declare no conflict of interest.**

All authors have read and approved the final version of manuscript.

Поступила в редакцию / Received 10.03.2025
Поступила после рецензирования / Reviewed 03.04.2025
Принята к публикации / Accepted 14.04.2025